

ISSN : 0854 - 5405



*Jurnal*  
**KERAMIK DAN GELAS INDONESIA**  
JOURNAL OF THE INDONESIAN CERAMICS AND GLASS

Vol. 26 No. 2 Desember 2017



KEMENTERIAN PERINDUSTRIAN  
BADAN PENELITIAN DAN PENGEMBANGAN INDUSTRI

**BALAI BESAR KERAMIK**

JKGI	VOL. 26	No. 2	Hal. 52 - 113	Bandung Desember 2017	ISSN 0854 - 5405
------	---------	-------	---------------	--------------------------	---------------------

Terakreditasi No: 658/AU3/P2MI-LIPI/07/2015

*Jurnal*

# KERAMIK DAN GELAS INDONESIA

JOURNAL OF THE INDONESIAN CERAMICS AND GLASS

**Vol. 26 No. 1 Juni 2017**

Jurnal Keramik dan Gelas Indonesia adalah majalah ilmiah yang diterbitkan dua kali dalam setahun untuk menyebarluaskan hasil-hasil penelitian dan pengembangan serta ulasan ilmiah tentang keramik dan gelas kepada lembaga penelitian dan pengembangan, ilmuwan, dan peminat lainnya. Tulisan dalam Jurnal Keramik dan Gelas Indonesia dapat dikutip dengan menyebutkan sumbernya.

Penanggung Jawab  
Kepala Balai Besar Keramik  
Ir. Supomo, M.Sc

Editor in Chief  
Ir. Hernawan, MT

Tim Penilai Kelayakan/Mitra Bestari  
DR. Handoko Setyo Kuncoro, ST, MT, M.Eng, Ph.D  
Dr. Eneng Maryani, S.Si, MT  
Dra. Sri Cicih Kurniasih, M.Si  
Drs. Fanani Hamzah, MS  
Dra. Naniek Sulistarihani, MS  
DR. Ir. Aristianto Muslim M. Barus, MSCE  
Dr. Diana Rakhmawaty E, M.Si  
Prof. Dr. Ir. Tarzan Sembiring  
Prof. DR. Ir. Bambang Sunendar Purwasasmita, M.Eng  
DR. Aditya Ramelan  
Drs. Suhandha  
Ir. Subari

Alamat  
Balau Besar Keramik  
Jl. Ahmad Yani No. 392 Bandung 40272  
Telp: (022) 7206221, 7207115, 7206296  
Fax: (022) 7205322  
e-mail: keramik@bbk.go.id

Berdasarkan SK LIPI No. 742/E/2012 dan Nomor Akreditasi : 461/AU2/P2MI/LIPI/08/2012  
ditetapkan sebagai majalah berkala ilmiah terakreditasi

**DAFTAR ISI**

	<b>Halaman</b>
1. Studi Awal Pemanfaatan Limbah Lumpur Pengolahan Ilmenit Sebagai Bahan Magnet <i>Preliminary Study of Utilization of Ilmenite Processing Mud Waste as a Magnet Material</i> Eneng Maryani, Tiar Ramadhan, Herlina Damayanti	52-60
2. Perkembangan Film Tipis Zirkonia: Sifat, Sintesis dan Aplikasi <i>Progress in Zirconia Thin Films: Properties, Synthesis, and Application</i> Ratih Resti Astari dan Rifki Septawendar	61-79
3. Studi Sifat Elektronik Lapisan Nano Tunggal Sic 3c Dengan Metode Perhitungan Prinsip Pertama <i>Study of SiC 3C Single Nano Layer Electronic Properties with First Principle Calculation</i> Muhammad Syaifun Nizar dan Ayu Ratnasari	80-86
4. Sintesis Precipitated Calcium Carbonated Dengan Asam Stearat Sebagai Pengubah Permukaan <i>Synthesis of Precipitated Calcium Carbonated With Acid Stearat As A Surface Modifier</i> Citra Fitriani K, Dede Taufik, Kristanto Wahyudi, dan Hernawan	87-95
5. Pembuatan dan Karakterisasi Material <i>Cutting Tools</i> Alumina Aditif Titania <i>Fabirication and Characterization Cutting Tools Alumina Aditif Titania</i> Maulid Purnawan, Soewanto Rahardjo, dan M. Sobron Lubis	96-102
6. Kesesuaian Sni Dengan Standar Internasional Pada Produk Kloset Duduk Keramik <i>Compatibility of Indonesian National Standard (SNI) to Internastional Standards on WC</i> Nurhidayati, Ratih Resti Astari, Hendra Kustiawan	103-113

## KATA PENGANTAR

Jurnal Keramik dan Gelas Indonesia Vol.26 No.2 Desember 2017 ini menyajikan 6 (enam) makalah yang ditulis oleh peneliti Balai Besar Keramik dan instansi litbang lainnya. Makalah-makalah tersebut membahas pemanfaatan limbah ilmenite sebagai bahan magnet, kajian film tipis zirkonia, simulasi dan perhitungan lebar pita energi lapisan nano tunggal SiC 3C, sintesis *precipitated calcium carbonated* dengan asam stearat sebagai pengubah permukaan, pembuatan material cutting tools alumina aditif titania dan kesesuaian sni dengan standar internasional pada produk kloset duduk keramik.

Pada makalah pertama barium ferri oksida yang dihasilkan termasuk jenis magnet keras karena memiliki nilai koersivitas ( $H_cj$ ) = 0,638-0,711 kOe. Karakteristik magnet lainnya yaitu nilai induksi remanen ( $B_r$ ) = 0,16-0,22 kG, energi maksimal ( $B_h_{max}$ ) = 0,001-0,01 MGOe dan densitas = 3,43-3,50 g/cm<sup>3</sup>.

Pada makalah kedua mengkaji lapisan film tipis zirkonia yang memiliki prospek sangat potensial untuk keramik, seperti konduktor ion oksigen dan sensor oksigen, sebagai lapisan pembatas termal, untuk lapisan penyangga dalam perangkat superkonduktor, laser, bidang katalis, sebagai bahan dielektrik, dan untuk penggunaan di bidang biomedis seperti untuk implan dalam tubuh manusia

Pada makalah ketiga dengan menggunakan prinsip pertama, sifat listrik suatu bahan pada ukuran skala nano dapat diprediksi dengan simulasi komputasi, sifat elektronik lapisan tunggal nano SiC 3C dihitung *density of state* dan struktur pita energi. Hasil komputasi SiC 3C lapisan nano tunggal dengan ukuran 1,3 x 1,3 nm ukuran sel kristal 3x3x1 didapatkan celah pita energi sebesar -1.7 eV mirip dengan semikonduktor tipe p dengan pita konduksi minimum berada 8 eV diatas pita valensi.

Pada makalah keempat menunjukkan persen CaCO<sub>3</sub> meningkat seiring dengan penambahan asam stearat dengan persen tertinggi 99,387 %. dalam bubur menentukan ukuran butir kapur yang dapat dicapai. Selain itu derajat putih (*whiteness*) dan derajat kecerahan (*brightness*) meningkat secara signifikan seiring dengan penambahan asam stearat, nilai yang tertinggi adalah *whiteness* 84,61 dan *brightness* 90,93 dengan konsentrasi asam stearat 2,5%.

Pada makalah kelima menunjukkan hasil pembakaran pada suhu 1700°C dengan metode substitusi karbon yang bersumber dari pasir silikon karbida yang bertujuan mengubah TiO<sub>2</sub> menjadi TiC, bahan dengan komposisi 97% Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, 3% TiO<sub>2</sub> mempunyai sifat yang lebih baik untuk dijadikan sebagai bahan *cutting tools* dengan kekerasan (*vickers hardness*) 25,21GPa.

Pada makalah keenam hasil analisis gap dengan JIS dan EN, SNI kloset duduk perlu perlu menambahkan pasal klasifikasi dan mengkaji pengujian serta syarat lulus uji khususnya uji pembilasan (Bowl Surface Flush Test). Sesuai perkembangan teknologi, SNI Kloset Duduk juga diharapkan dapat mengakomodir isu penghematan air (*water saving efficiency*).

Hasil penelitian dan kajian di atas diharapkan dapat menyumbangkan kemajuan teknologi keramik di Indonesia, sehingga tidak terlalu tertinggal dengan kemajuan teknologi keramik di negara lain.

Redaksi



# STUDI SIFAT ELEKTRONIK LAPISAN NANO TUNGGAL SiC 3C DENGAN METODE PERHITUNGAN PRINSIP PERTAMA

*Study of SiC 3C Single Nano Layer Electronic Properties with First  
Principle Calculation*

**Muhammad Syaifun Nizar dan Ayu Ratnasari**

Balai Besar Keramik, Jl. Jendral Ahmad Yani No.392 Bandung 40272

Naskah masuk: 28 November 2017, Revisi: 14 Desember 2017, Diterima: 28 Desember 2017

## ABSTRAK

*P*erkembangan teknologi saat ini membutuhkan semikonduktor dengan performa yang tinggi dan mengarah kepada fabrikasi transistor dengan ukuran proses node dibawah 14 nm. SiC 3C mempunyai potensi untuk dijadikan semikonduktor menggantikan semikonduktor berbasis silikon karena memiliki sifat tahan temperatur tinggi dan memiliki celah pita energi yang lebar. Sifat listrik bahan pada skala nano masih harus banyak penelitian yang perlu dilakukan supaya bisa dipakai sebagai bahan semikonduktor. Dengan menggunakan prinsip pertama, sifat listrik suatu bahan pada ukuran skala nano dapat diprediksi dengan simulasi komputasi, sifat elektronik lapisan tunggal nano SiC 3C dihitung density of state dan struktur pita energi. Hasil komputasi SiC 3C lapisan nano tunggal dengan ukuran 1,3 x 1,3 nm ukuran sel kristal 3x3x1 didapatkan celah pita energi sebesar -1.7 eV mirip dengan semikonduktor tipe p dengan pita konduksi minimum berada 8 eV diatas pita valensi.

**Kata Kunci:** SiC 3C, lapisan nano tunggal, semikonduktor, prinsip pertama, density of states, struktur pita energi.

## ABSTRACT

*C*urrent technological developments require high performance semiconductors and lead to the fabrication of transistors proccess node under 14nm size. SiC 3C has the potential to be used as semiconductor to replace silicon-based semiconductors because it has high temperature resistant properties and wide bandgap. There is still much research work to be done on eletrical properties of nano materials so it can be used as semiconductor materials. Using the first principle the eletrical properties of nano materials can be predicted with simulation computation, the electronic properties of SiC 3C single nano layer calculated the density of state and the band structure. The computational results of 1,3 x 1,3 nm square area of single nano layer SiC 3C with 3x3x1 crystal cell obtained an energy band

*gap of -1.7 eV similar to a p-type semiconductor with minimum conduction band is 8 eV above the valence band.*

**Kata Kunci:** SiC 3C, single nano-layer, semiconductor, prinsip pertama, density of states, band structure

## I. PENDAHULUAN

Silikon karbida merupakan salah satu bahan keramik maju yang memiliki beberapa keunggulan pada sifat listrik, ketahanan mekanik, ketahanan temperatur tinggi sehingga digunakan sebagai bahan untuk aplikasi komponen elektronik teknologi tinggi seperti sensor, transistor, mosfet dan generator frekuensi radio tinggi <sup>(1)</sup>. Peralatan teknologi tinggi saat ini membutuhkan komponen elektronik dengan performa yang tinggi, contohnya adalah komponen elektronik MOSFET yang tahan temperatur tinggi, transistor untuk prosesor dengan frekuensi tinggi, dan trend dunia saat ini adalah membuat peralatan yang hemat energi.

Penelitian bahan keramik maju untuk bidang elektronik mengarah kepada efisiensi proses fabrikasi, peningkatan performa dan penghematan energi. Perkembangan pembuatan komponen elektronik dibuat dengan skala yang lebih kecil tiap tahunnya untuk mengejar kebutuhan teknologi yang semakin

berkembang pesat. Teknologi fabrikasi komponen elektronik tahun 2017 sudah di ukuran 14nm <sup>(2)</sup> yang masih didominasi oleh transistor silikon. Akan tetapi semikonduktor dengan bahan silikon mempunyai kelemahan tidak bisa beroperasi dengan baik diatas temperatur 150°C <sup>(3)</sup>. Silikon karbida mempunyai potensi sebagai bahan pembuat transistor menggantikan silikon karena memiliki beberapa keunggulan karena sifatnya yang refraktori dan mempunyai kecepatan saturasi aliran elektron yang lebih tinggi dari silikon ( $2 \times 10^7$  cm/s)<sup>2</sup> <sup>(4)</sup>.

Penelitian tentang penggunaan bahan silikon karbida untuk transistor dan mosfet sedang berkembang <sup>(5)(6)</sup>. Dengan menggunakan simulasi model suatu material dengan bantuan komputer lebih memudahkan penelitian karena lebih murah dibandingkan analisa laboratorium yang kompleks dan membuat siklus desain menjadi lebih cepat. Pada penelitian ini akan dihitung dengan

menggunakan metode prinsip pertama untuk memodelkan material atau menghitung model atom dan energi berdasarkan hukum mekanika kuantum untuk mengetahui sifat elektronik lapisan nano silikon karbida 3C. Dengan ukuran skala nano diharapkan bahan SiC-3C ini mempunyai performa yang lebih bagus untuk digunakan pada aplikasi elektronik.

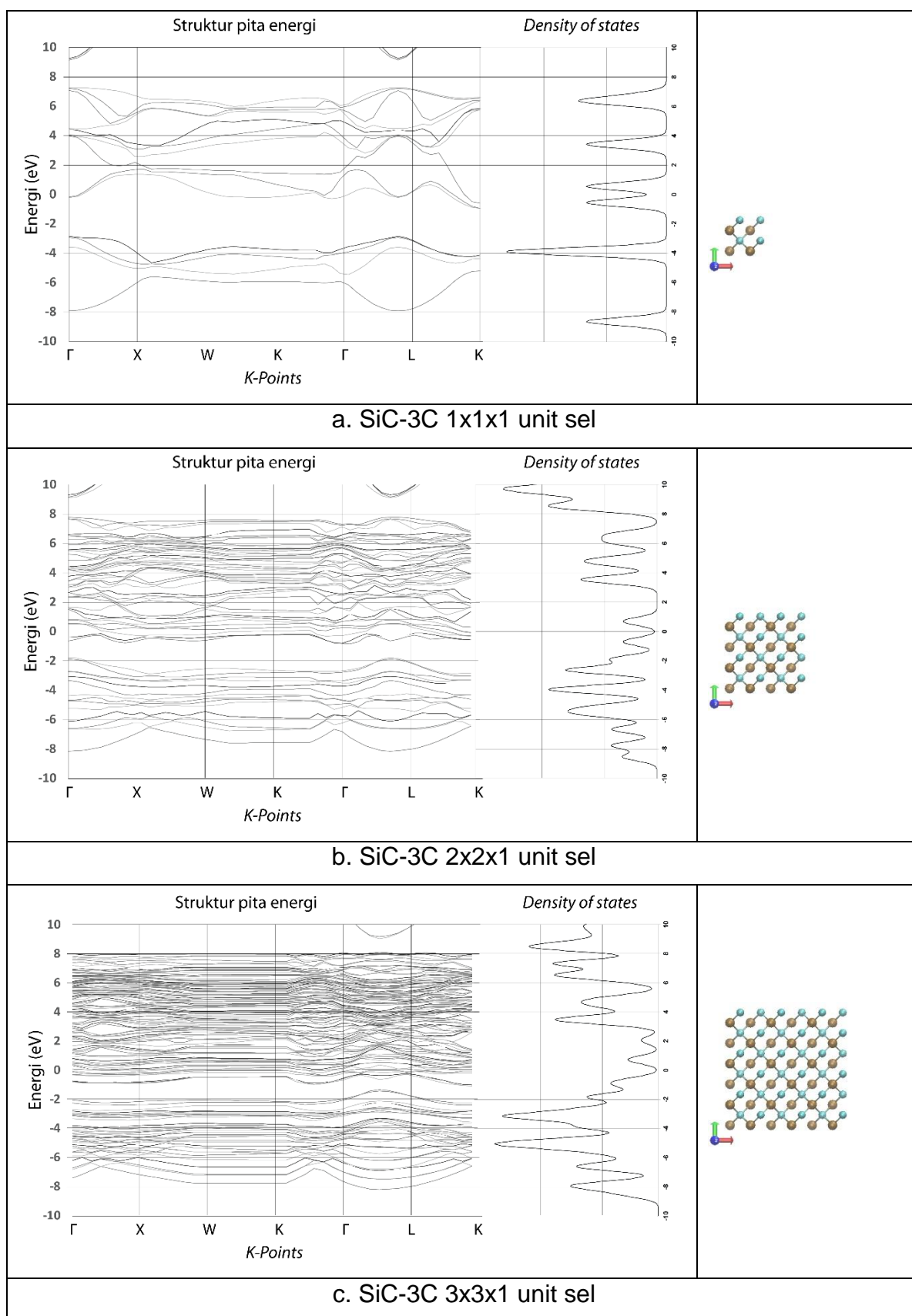
## II. METODOLOGI

Struktur dan sifat SiC 3C di hitung dengan menggunakan prinsip pertama dengan jumlah atom 8, 32 dan 72 atom. Perhitungan dilakukan dengan program CP2K versi 5.1 <sup>(7)</sup> berbasis teori fungsional kerapatan (*Density Functional Theory*). Energi *ground state* dan optimasi keseluruhan struktur pada komputasi ini dihitung dengan menggunakan *pseudopotential* GPW (*Gaussian and plane waves method*) GTH (Goedecker-Teter-Hutter *pseudopotentials*) dan *basis set plane wave* dan *fungsional exchange correlation Generalized Gradient Approximation* of Perdew-Burke-Ernzerhof (GGA-PBE) <sup>(8)(9)(10)</sup>. Optimasi parameter konvergen akurasi energi sebesar  $10^{-6}$  Ry. Nilai sampling k-point adalah 3 x 3 x 1 dengan tipe

Monkhorst *pack grid* <sup>(11)</sup>. Ukuran kisi Kristal atau panjang sumbu z unit Kristal yang dipakai untuk perhitungan diambil sebesar 4.3596. Banyak metode perhitungan untuk mengetahui sifat elektronik suatu struktur, pada penelitian ini diambil perhitungan untuk menghitung kerapatan elektron atau *density of states*, perhitungan *density of state* menggunakan persamaan (1) untuk menghitung jumlah elektron pada pita konduksi per satuan volume pada rentang energi dE

$$g(E)dE = \frac{m^*[2m^*(E-E_c)]^{1/2}}{\pi^2 \hbar^3} dE \quad (1)$$

, sedangkan struktur pita energi atau disebut band struktur dihitung dengan persamaan . Dan dari data hasil perhitungan dibuat gambar struktur Kristal dan orbit elektron. Kristal SiC dihitung dengan ukuran kelipatan kisi sel Kristal 1x1x1, 2x2x1, 3x3x1 berbentuk 1 lapisan. Dari data hasil perhitungan, daerah energi yang diambil berada pada rentang -10 eV – 10 eV. Data-data hasil komputasi kerapatan elektron diolah dengan script cp2k\_pdos.py yang dibuat oleh Tiziano Müller agar bisa ditampilkan sebagai grafik.



Gambar 1. Perbandingan struktur pita energi dan density of states SiC-3C ukuran unit sel 1x1x1, 2x2x1, dan 3x3x1

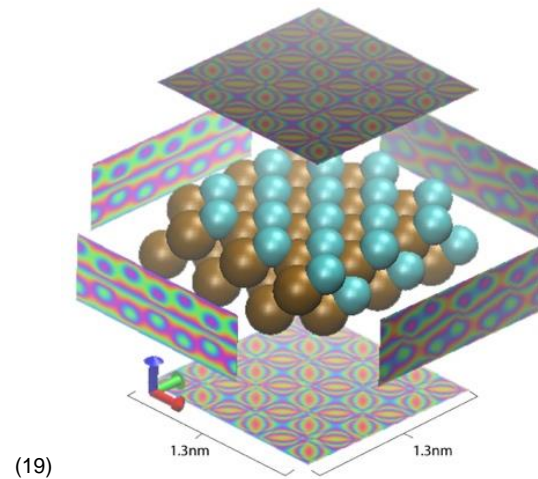


Sedangkan data-data hasil perhitungan struktur pita energi dihitung pada daerah zona Brillouin K *path*  $\Gamma$  - X - W - K -  $\Gamma$  - L - K yang ditentukan dengan bantuan *SeeK-path: the k-path finder and visualizer* <sup>(12)</sup> lalu diolah dengan script *cp2k\_bs2csv.py* dari CP2K agar dapat ditampilkan sebagai grafik. Visualisasi data menggunakan software VMD <sup>(13)</sup> untuk menampilkan citra 3D struktur Kristal SiC 3C. Hasil perhitungan energi konvergen setelah 12-13 tahap perhitungan dengan total energi sebesar -1039.1703517830201 eV untuk 1 unit sel, -4197.479833071023 eV untuk sel ukuran 2x2x1, dan -9448.97262389762 eV untuk sel ukuran 3x3x1.

#### IV. KESIMPULAN

Pada gambar 2. Struktur nano SiC 3C lapisan tunggal arah *lattice* Kristal SiC adalah (111) pada sumbu Z, dengan bentuk bidang datar seperti ini maka mempunyai potensi untuk dibuat semikonduktor tipe p untuk aplikasi *Heterojunction Bipolar Transistor* (HBT) <sup>(17)</sup> dan juga untuk aplikasi *High Mobility electron Transistor* (HEMT) <sup>(18)</sup> dengan frekuensi yang tinggi dengan catatan desain konfigurasi lapisan dibuat tidak

terlalu dekat dengan kontak basis dan kolektor untuk menghindari voltage breakdown dan juga memperhatikan tegangan listrik operasi yang lebih kecil serta temperatur operasi semikonduktor SiC bisa mencapai 600°C



(19).

Gambar 2. Citra 3 dimensi irisan proyeksi kerapatan elektron pada bidang sumbu x,y, dan z dari lapisan tunggal nano SiC-3C bentuk persegi ukuran 1.3nm.

Hasil kalkulasi material SiC 3C lapisan nano tunggal dengan ukuran 1,3 x 1,3 nm dengan ukuran sel kristal 3x3x1 didapatkan celah pita energi sebesar -1.7 eV dan pita energi konduksi minimum berada pada nilai 8 eV diatas pita valensi. Maka dari itu bahan nano silikon karbida 3C lapisan tunggal mempunyai potensi untuk dibuat menjadi bahan semikonduktor tipe p pada aplikasi transistor

performa tinggi seperti HEMT dan HBT.

## DAFTAR PUSTAKA

1. de Samber, M., *Power Devices*, 40(3),703–721.  
<https://doi.org/10.1002/9783527623051.ch37>). (2008).
2. Vignette, M., 14nm FDSOI Technology for High Speed and Energy Efficient Applications, 14–15. Retrieved from <https://www.politesi.polimi.it/handle/10589/84805>, (2013).
3. Schroder, D. K., & Babcock, J. A., Negative bias temperature instability: Road to cross in deep submicron silicon semiconductor manufacturing. *Journal of Applied Physics*, 94(1), 1–18.  
<https://doi.org/10.1063/1.1567461> (2003).
4. Ferry, D. K., High-field transport in wide-band-gap semiconductors. *Physical Review B*, 12(6), 2361–2369.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.12.2361>, (1975).
5. Search, H., Journals, C., Contact, A., Iopscience, M., Address, I. P., Podlivaev, A. M., ... Manuscript, A., d M us pt, 0–28.  
<https://doi.org/10.1088/1361-665X/aa8886>, (2016)
6. Wen, Z., Zhang, F., Shen, Z., Tian, L., Yan, G., Liu, X., ... Zeng, Y., A novel silicon carbide accumulation channel injection enhanced gate transistor with buried barrier under shielding region. *IEEE elektron Device Letters*, 38(7), 941–944.  
<https://doi.org/10.1109/LED.2017.2709322>, (2017).
7. Hutter, J; Iannuzzi, M; Schiffmann, F; VandeVondele, J. WILEY INTERDISCIPLINARY REVIEWS-COMPUTATIONAL MOLECULAR SCIENCE, 4 (1), 15-25, CP2K: atomistic simulations of condensed matter systems.  
<http://dx.doi.org/10.1002/wcms.1159>), (2014).
8. S. Goedecker, M. Teter, and J. Hutter, Separable dual-space Gaussian pseudopotentials, *Phys. Rev. B* 54, 1703-1710, (1996).
9. C. Hartwigsen, S. Goedecker, and J. Hutter, Relativistic separable dual-space Gaussian pseudopotentials from H to Rn, *Phys. Rev. B* 58, 3641-3662, (1998).
10. M. Krack, Pseudopotentials for H to Kr optimized for gradient-corrected exchange-correlation functionals, *Theor. Chem. Acc.* 114, 145-152, (2005).

11. Monkhorst, Hendrik J., and James D. Pack., Physical Review B 13.12: 5188-5192.), (1976).
12. Y. Hinuma, G. Pizzi, Y. Kumagai, F. Oba, I. Tanaka, Band structure diagram paths based on crystallography, Comp. Mat. Sci. 128, 140, DOI: 10.1016/j.commatsci.2016.10.015 (the "HPKOT" paper; arXiv version: arXiv:1602.06402), (2017).
13. Humphrey, W., Dalke, A., & Schulten, K., {VMD} -- {V}isual {M}olecular {D}ynamics. Journal of Molecular Graphics, 14, 33–38, (1996).
14. Neamen, Donald A., Semiconductor Physics and Devices: Basic Principles (3rd ed.). McGraw-Hill Higher Education. ISBN 0-07-232107-5), (2003).
15. Wenzien, B., Kackell, P., & Bechstedt, F., Quasiparticle band structure of silikon carbide polytypes. Physical Review B, 52(15), 10897–10905. <https://doi.org/10.1107/S0108270192000222>), (1995).
16. Zhang, J.-M., Zheng, F.-L., Zhang, Y., & Ji, V., First-principles study on electronic properties of SiC nanoribbon. Journal of Materials Science, 45(12), 3259–3265. <https://doi.org/10.1007/s10853-010-4335-5>), (2010).
17. Nakagomi, S., Hiratsuka, K., Kakuda, Y., & Yoshihiro, K., Beta-Gallium Oxide/SiC Heterojunction Diodes with High Rectification Ratios. ECS Journal of Solid State Science and Technology, 6(2), Q3030–Q3035. <https://doi.org/10.1149/2.0061702jss>, (2017).
18. Aubry, R., Jacquet, J. C., Oualli, M., Patard, O., Piotrowicz, S., Chartier, E., ... Delage, S. L., ICP-CVD SiN Passivation for High-Power RF InAlGaN/GaN/SiC HEMT. IEEE elektron Device Letters, 37(5), 629–632. <https://doi.org/10.1109/LED.2016.2540164>, (2016).
19. Matus, L. G., Powell, J. A., Petit, J. B., & Park, B., Development of Silicon Carbide Semiconductor Devices for High Temperature Applications, 0–9. (1991).